

ЗАСТОСУВАННЯ ПРИНЦИПУ БЛИЗЬКОДІЇ В ТЕОРІЇ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ В GaN

О.П. Малик, Г.В. Кеньо

Національний університет “Львівська політехніка”
вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

(Отримано 11 квітня 2011 р.)

Розглянуто процеси розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі, зумовленому взаємодією з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, полем статичної деформації, іонізованими та нейтральними домішками в зразках GaN зі структурою вюртциту та з концентрацією домішок $4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ та $2 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Розраховані температурні залежності рухливості електронів в інтервалі $40 - 500 \text{ K}$.

Ключові слова: явища переносу, розсіяння носіїв заряду, нітрид галію.

PACS: 72.20.Dp

УДК: 621.315.592

Вступ

Нітрид галію (GaN) є одним з матеріалів, який широко застосовують у приладах, що працюють за високих температур та високих частот. Зокрема, цей матеріал застосовується під час виробництва високо-ефективних світлодіодів, що працюють у голубій та фіолетовій ділянках спектра [1, 2]. Подальший прогрес у проектуванні та оптимізації приладів, створених на основі GaN, вимагає детального моделювання фізичних параметрів цього матеріалу. Одним з таких параметрів є рухливість носіїв заряду. Експериментальні дані із залежності рухливості носіїв від температури та рівня легування домішками наведені в роботах [3–10]. Теоретичну інтерпретацію цих даних виконували за методом Монте-Карло [11], в наближенні часу релаксації [12], варіаційним методом [13, 14] та методом ітерацій [15, 16]. Спільною особливістю всіх цих методів є використання для опису явищ переносу в цьому матеріалі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. У цих моделях припускалося, що носій взаємодіє з усім кристалом (електрон-фононна взаємодія) або носій взаємодіє з потенціалом зарядженої домішки, радіус дії якого $\sim 20 - 100a_0$ (a_0 – стала ґратки). Однак, таке припущення містить наступні протиріччя: а) воно суперечить спеціальній теорії відносності, згідно з якою носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристала; б) воно суперечить атомістичному принципу, згідно з яким носій взаємодіє (віддає енергію) тільки з одним атомом, а не з багатьма атомами одночасно. Крім того, для дефектів з потенціалом взаємодії $U \approx \frac{1}{r^n}$ ($n = 1, 2$) на відстанях $\sim 10a_0$ потенціал стає величиною другого порядку малості, тоді як зазначені вище моделі роз-

глядаються в першому (борнівському) порядку теорії збурень. З іншого боку, в роботах [17–19] були запропоновані близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$, в яких вище вказані недоліки були відсутні. Припускали, що носій взаємодіє з потенціалом дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки. Метою теперішньої роботи є застосування цього підходу для опису розсіяння електронів на різних типах дефектів кристалічної ґратки в GaN.

Теорія

Всі вищезазначені близькодіючі моделі розсіяння описують явища переносу в напівпровідниках зі структурою цинкової обманки. Для того, щоб застосувати ці моделі до нітриду галію, який має структуру вюртциту, у формули для ймовірності переходу носія з стану \mathbf{k} в стан \mathbf{k}' вводяться такі зміни:

а) об'єм елементарної комірки структури цинкової обманки $V_{ZB} = \frac{a_0^3}{4}$ замінюється об'ємом елементарної комірки структури вюртциту $V_W = \frac{a_0^2 c_0 \sqrt{3}}{2}$ (a_0, c_0 – стали ґратки гексагональної структури);

б) під час інтегрування по хвильовому вектору носія стала ґратки структури цинкової обманки a_0 замінюється виразом $\frac{a_0 + c_0}{2}$.

З врахуванням цього ймовірність переходу носія заряду з стану \mathbf{k} в стан \mathbf{k}' , зумовленого взаємодією з полярним оптичним (ПО), неполярним оптичним (НПО), п'єзооптичним (ПОП), п'єзоакустичним (ПАК), акустичним фононами (АК), іонізованою домішкою (ІД), потенціалом статичної деформації (СД) матимуть вигляд [17, 18]:

$$W_{\text{ПО}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{a_0^6}{12c_0^2 \left(\frac{a_0+c_0}{2}\right)^8} \frac{64\pi^7 \gamma_{\text{PO}}^{10} e^4}{225\varepsilon_0^2 G} \frac{M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}}{M_{\text{Ga}} M_{\text{N}}} \left\{ \frac{1}{\omega_{\text{LO}}} [N_{\text{LO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{LO}}) + (N_{\text{LO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{LO}})] + \frac{2}{\omega_{\text{TO}}} [N_{\text{TO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{TO}}) + (N_{\text{TO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{TO}})] \right\}; \quad (1)$$

$$W_{\text{НПО}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{\left(\frac{a_0+c_0}{2}\right)^2} \frac{\pi^3 E_{\text{НПО}}^2}{288G} \frac{M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}}{M_{\text{Ga}} M_{\text{N}}} \left\{ \frac{1}{\omega_{\text{LO}}} [N_{\text{LO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{LO}}) + (N_{\text{LO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{LO}})] + \frac{2}{\omega_{\text{TO}}} [N_{\text{TO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{TO}}) + (N_{\text{TO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{TO}})] \right\}; \quad (2)$$

$$W_{\text{ПОП}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{a_0^{10}}{\left(\frac{a_0+c_0}{2}\right)^{10}} \left(\frac{32}{75}\right)^2 \frac{\pi^9 e^2 \varepsilon_{14}^2 \gamma_{\text{PZ}}^{10}}{\varepsilon_0^2 G} \frac{M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}}{M_{\text{Ga}} M_{\text{N}}} \left\{ \frac{1}{\omega_{\text{LO}}} [N_{\text{LO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{LO}}) + (N_{\text{LO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{LO}})] + \frac{2}{\omega_{\text{TO}}} [N_{\text{TO}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\text{TO}}) + (N_{\text{TO}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\text{TO}})] \right\}; \quad (3)$$

$$W_{\text{ПАК}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{a_0^{10}}{\left(\frac{a_0+c_0}{2}\right)^8} \frac{128\pi^7 e^2 \varepsilon_{14}^2 \gamma_{\text{PZ}}^{10} k_B T}{225\varepsilon_0^2 \hbar G [M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}]} \left(\frac{1}{c_{\text{LO}}} + \frac{2}{c_{\text{TO}}}\right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (4)$$

$$W_{\text{АК}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left[4 \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{-3} \frac{a_0^2 c_0 \sqrt{3}}{2} \right]^2 \frac{\pi^3 k_B T E_{\text{АК}}^2}{144 \hbar G [M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}]} \left(\frac{1}{c_{\text{LO}}} + \frac{2}{c_{\text{TO}}}\right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (5)$$

$$W_{\text{ІД}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^4 \frac{\pi e^4 Z_i^2 N_{\text{ІД}} \gamma_{\text{ІІ}}^4}{2\varepsilon_0^2 \hbar V} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (6)$$

$$W_{\text{СД}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{2^5 3^4 \pi^3 C^2 e^2 \varepsilon_{14}^2 N_{\text{СД}}}{V \varepsilon_0^2 \hbar} \frac{1}{q^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (7)$$

де M_{Ga} , M_{N} – маса атома; G – кількість елементарних комірок в об'ємі кристала; ε_0 – діелектрична стала; e – заряд електрона; N_{LO} ; N_{TO} – кількість поздовжніх (LO) та поперечних (ТО) фононів з частотою ω_{LO} і ω_{TO} відповідно (під час розрахунків приймали, що $\omega_{\text{LO}} = \omega_{\text{TO}}$); ε_{14} – компонента п'єзоелектричного тензора; k_B – стала Больцмана; c_{LO} , c_{TO} – відповідні швидкості звуку ($c_{\text{LO}} = c_{\text{TO}} = c$); V – об'єм кристала; $N_{\text{ІД}}$, $N_{\text{НД}}$, $N_{\text{СД}}$ – концентрація іонізованих та нейтральних домішок, центрів статичної деформації; Z_i – кратність іонізації домішки; \hbar – стала Планка; $\delta(\varepsilon)$ – дельта-функція Дірака; $E_{\text{АК}}$, $E_{\text{НПО}}$ – акустичний та оптичний потенціали деформації відповідно; γ_{PO} , γ_{PZ} , γ_{II} – підгоночні параметри, що визначають радіус дії близькодіючого потенціалу ($R = \gamma a_0$, $0 < \gamma_{\text{PO}}, \gamma_{\text{PZ}} \leq \sqrt{1 + a_0^2/c_0^2}/2 = 1.187$, $0 \leq \gamma_{\text{II}} \leq (1 + c_0/a_0)/2 = 1.31$); $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$; $C \approx 0.1$; $\mathbf{k}(\varepsilon)$ – хвильовий вектор електрона.

У виразах (1)–(7) перший множник у правій частині являє собою геометричний фактор, що враховує відмінність структури вюртциту від структури сфалериту.

Варто відзначити, що сильна степенева залежність підгоночних параметрів різко обмежує можливість вибору їх числових значень.

Обчислювали компоненти тензора провідності на основі формалізму точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [25]. Використовуючи цей формалізм, можемо отримати додатковий підгоночний параметр $\gamma_{\text{SS}} N_{\text{СД}}$ для СД-механізму розсіяння [18]. Параметри кристалів GaN, що використовувалися під час розрахунків, наведені в табл. 1. Єдиний параметр, значення якого відсутні в літературі, це оптичний потенціал деформації ($E_{\text{НПО}}$). Для його оцінювання використаємо той факт, що для GaP, GaAs, GaSb значення цього параметра відповідно 28.9, 36.4 та 32.3 еВ [26]. Тому для GaN значення $E_{\text{НПО}}$ вибрали 29 еВ.

Порівняння теорії та експерименту

Порівнювали теоретичні температурні залежності рухливості електронів з експериментальними даними, наведеними в роботах [5] (концентрація домішок $N_D \sim 4 \times 10^{16} \text{см}^{-3}$) та [7] (зразок 5 з концентрацією домішок $N_D \sim 2 \times 10^{19} \text{см}^{-3}$). Під час розрахунків припускалося, що у всьому розглянутому інтервалі температур 40 – 500 існує домішкова провідність. Рівень Фермі визначався з рівняння електронейтраль-

ності $n = 1/eR = N_D^+$, де R – експериментальне значення коефіцієнта Холла.

Теоретичні криві $\mu(T)$ для GaN наведені на рис. 1а, б. Суцільні лінії представляють криві, розраховані на основі близькодіючих моделей в межах точного розв'язку рівняння Больцмана. У табл. 2 наведені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Видно, що теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінювання значення різних механізмів розсіяння на рис. 1а, б точковими лініями зображені відповідні залежності.

З рис. 1а видно, що в зразку з низькою концен-

трацією домішок за низьких температур ($T < 70$ K) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації (крива 7). Дещо меншим, але не знехтувано малим є розсіяння на акустичних фонах (крива 1), вплив якого по мірі підвищення температури зростає. У разі високих температур домінуючим механізмом розсіяння стає розсіяння на полярних оптичних фонах (крива 5), однак, розсіяння на акустичних фонах є теж істотним. В області низьких температур спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це можна пояснити неповнотою СД-моделі розсіяння [18], де повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

Таблиця 1

Параметри GaN зі структурою вюртцита

Параметр матеріалу	Значення	Література
Постійна ґратки, a_0 (м)	3.189×10^{-10}	[20]
c_0 (м)	5.185×10^{-10}	
Ширина забороненої зони, E_g (eV)	$3.503 - 5.08 \times 10^{-4}T^2/(T + 996)$	[20, 21]
Ефективна маса електрона, m_n/m_0	0.22	[12, 13]
Густина, ρ_0 (кг/м ³)	6.1×10^3	[22, 24]
Оптичний потенціал деформації, $E_{НПО}$ (eV)	29	Оцінка
Частота поздовжніх оптичних фонів, ω_{LO} (рад/с)	13.983×10^{13}	[11, 13]
Статична діелектрична стала, ϵ_s	10.4	[11, 12]
Високочастотна діелектрична стала, ϵ_∞	5.47	[11, 12]
Акустичний потенціал деформації, $E_{АС}$ (eV)	9.2	[12, 23]
Швидкість звуку, c (м/с)	6.59×10^3	[22, 24]
П'єзоелектрична стала, e_{14} (Кл/м ²)	0.5	[11,12]

Таблиця 2

Концентрація домішки, см ⁻³	γ_{PO}	γ_{PZ}	γ_{PI}	$\gamma_{SS}N_{CD} \times 10^{-14} \text{cm}^{-3}$
$N_D \sim 4 \times 10^{16}$	0.93	0.44	1.0	8.0
$N_D \sim 2 \times 10^{19}$	0.80	0.44	0.62	180.0

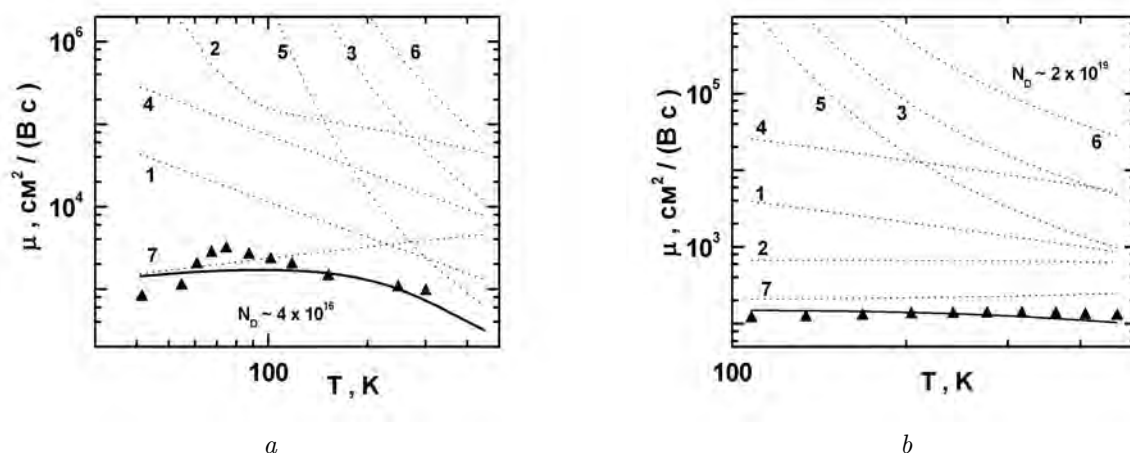


Рис. 1. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах GaN. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД-механізми розсіяння відповідно

У зразку з високою концентрацією домішок (рис. 1b) має місце виродження електронного газу, відповідно рухливість носіїв майже не змінюється з температурою. Тут у всьому розглянутому інтервалі температур основним механізмом розсіяння є розсіяння на центрах статичної деформації, концентрація яких є майже на два порядки вища. Окрім того, істотним є вплив розсіяння на іонізованих домішках, а за високих температур необхідно враховувати розсіяння на акустичних та полярних оптичних фононах.

Решта механізмів розсіяння, таких, як розсіяння на неполярних оптичних фононах, розсіяння на п'єзооптичних та п'єзоакустичних фононах – роблять знехтувано малий внесок.

Порівнюючи два конкуруючі підходи до описування явищ переносу – далекодіючого та близькодіючого, необхідно відзначити таке. У далекодіючих моделях під час обчислення матричного елемента взаємодії інтегрування ведеться в межах від нуля до нескінченності (початок сферичної системи координат розташований у центрі дефекту):

$$H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \Psi^* U \Psi dV, \quad (8)$$

де U – оператор потенціальної енергії дефекту, Ψ – хвильова функція електрона.

Цей вираз можна представити наступним чином

$$H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx \int_0^{\gamma a_0} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \Psi^* U \Psi dV + \int_{\gamma a_0}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \Psi^* U \Psi dV. \quad (9)$$

У близькодіючих моделях матричний елемент має вигляд

$$H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx \int_0^{\gamma a_0} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \Psi^* U \Psi dV, \quad (10)$$

тобто, відрізняється на величину другого інтегралу. У пропонуваній роботі математично доведено, що, використовуючи матричний елемент близькодіючих моделей (10), можемо досягнути узгодження з експериментальними даними. Це означає, що вплив другого інтеграла у виразі (9) на опис характеристик кристалу практично нульовий, тому з математичного погляду ним можна повністю знехтувати.

Висновки

На основі принципу близькодії розглянуто процеси розсіяння електронів на різного типу дефектах ґратки в кристалах GaN зі структурою вюртциту. Встановлено достатньо добру узгодженість теорії та експериментальних даних у дослідженому інтервалі температур.

Література

- [1] I. Akasaki, H. Amano, placeN. Koide, M. Kotaki, K. Manabe // *Physica B*. – 1993. – Vol. 185. – P.428–431.
- [2] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagayama // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 1995. – Vol. 34.- P. L797-L781.
- [3] M.A. Khan, J.N. Kuznia, J.M.Van Hove, D.T. Olson // *Appl. Phys. Lett.* – 1991. – Vol. 58. – P. 526–528.
- [4] S. Strite, H. Morkoc // *J. Vac. Sci. Technol B*. – 1992. – Vol. 10. – P.1237–1266.
- [5] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh // *J. Appl. Phys.* – 1992. – Vol. 71. – P. 5543–5549.
- [6] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 1992. – Vol. 31. – P. 2883–2888.
- [7] W. CityGotz, N.M. Johnson, C. Chen, H. Lin, C. Kuo, W. Imler // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 68. – P. 3144–3146.
- [8] D.K. Gaskill, L.B. Rowland, K. Doverspike // *EMIS datareviews series*. – Vol. 11. – 1995. – P. 101–116.
- [9] J.G. Kim, A.C. Frenkel, H. Liu, R.M. Park // *Appl. Phys. Lett.* – 1994. – Vol. 65. – P. 91–93.
- [10] M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur *Properties of advanced semiconductor materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New York. – John Wiley & Sons Inc., 2001.
- [11] J. D. Albrecht, R. P. Wang, P. P. Ruden, M. Farahmand, K. F. Brennan // *J. Appl. Phys.* – 1998. – Vol. 83. – P. 4777–4781.
- [12] S. Aydogu, O. Ozbas // *Mater. Sci. Semicond. Proc.* – 2005. – Vol. 8. – P. 536–539.
- [13] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, T. Osotchan // *J. Appl. Phys.* – 1994. – Vol. 75. – P. 7365–7342.
- [14] V.W.L. Chin, Bing Zhou, T.L. Tansley, Xin Li // *J. Appl. Phys.* – 1995. – Vol. 77. – P. 6064–6066.
- [15] S. Dhar, S. Ghosh // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol. 86. – P. 2668–2676.
- [16] D.C. Look, J.R. Sizelove, S. Keller, C Y.F. Wu, U.K. Mishra, S.P. DenBaars // *Solid State Commun.* – 1997. – Vol. 102. – P. 297–300.
- [17] O.P. Malyk // *Mater. Sci. & Engineering B*. – 2006. – Vol. 129. – P. 161–171.
- [18] O.P. Malyk // *Phys. Stat. Sol (c)*. – 2009. – Vol. 6. – P. S86–S89.
- [19] O.P. Malyk // *Physica B:Condensed Matter*. – 2009. – Vol. 404. – P. 5022–5024.
- [20] S. N. Mohammad, H. Morkoc // *Prog. Quant. Electr.* – 1996. – Vol. 20. – P. 361–525.
- [21] F. Bechstedt, J. Furthmuller, M. Ferhat, L.K. Teles, L.M.R. Scolfaro, S.R. Leite, V.Yu. Davydov, O. Ambacher, R. Goldhahn // *Phys Stat Sol.(a)*. – 2003. – Vol. 195. – P. 628–633.

- [22] Morkoc H. Nitride semiconductors and devices. Berlin, Heidelberg, New York: Springer; 1999. P.826–829.
- [23] C.G. Rodridgues, V.N. Freire, A.R. Vasconcellos, R. Luzzi // Mater. Res. – 2002. – Vol. 6. – P. 1–4.
- [24] S.K. O’Leary, B.E. Foutz, M.S. Shur, U.V. Bharkor, L.F. Eastman // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 83. – P. 826–829.
- [25] O.P. Malyk // WSEAS Trans. Math. – 2004. – Vol. 3. – P. 354–357.
- [26] A. Blacha, H. Presting, M. Cardona // Phys. Stat. Sol.(b). – 1984. – Vol. 126. – P.11–36.

ПРИМЕНЕНИЕ ПРИНЦИПА БЛИЗКОДЕЙСТВИЯ В ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В GaN

О.П. Малик, Г.В. Кеньо

*Национальный университет “Львівська політехніка”,
ул. С. Бандеры, 12, Львов, 79013, Украина*

Рассмотрены процессы рассеяния электронов на близкодействующем потенциале обусловленном взаимодействием с полярными и неполярными оптическими фононами, пьезоэлектрическими и акустическими фононами, статической деформации, нейтральной и заряженной примеси в образцах GaN со структурой вюртцита и концентрацией примеси $4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и $2 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Рассчитаны температурные зависимости подвижности электронов в интервале 40 – 500 K.

Ключевые слова: явления переноса, рассеяние носителей заряда, нитрид галлия

PACS: 72.20.Dp

УДК: 621.315.592

THE USE OF THE SHORT-RANGE PRINCIPLE IN THE ELECTRON SCATTERING THEORY IN GaN

O.P. Malyk, G.V. Kenyo

*National University “Lvivska Politechnika”
12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

The processes of the electron scattering on the short-range potential caused by interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons, static strain, neutral and ionized impurities in wurtzite GaN samples with impurity concentration $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ and $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ are considered. The temperature dependences of the electron mobility in temperature range 40 – 500 K are calculated.

Key words: transport phenomena, charge carrier scattering, gallium nitride.

PACS: 72.20.Dp

УДК: 621.315.592